Implementação de um módulo de cálculo no programa TOP para combinação de descritores topológicos

Jorge Fábio Correia Lopes¹ (IC), Porfírio Jesus das Neves(PQ)¹, Vinícius Tomaz Gonçalves (IC)¹, João Batista Neves DaCosta(PQ)^{1,7}

¹DEQUIM– ICE – UFRuralRJ - BR-465, Km 7 –Seropédica- Rio de Janeiro - CEP. 23.890-000 - *dacosta@ufrj.br

Palavras Chave: *descritores topológicos, índices de conectividade, TOP.*

Introdução

Avanços recentes em recursos computacionais, principalmente no que se refere a softwares voltados para a área de farmacologia química, têm possibilitado o desenvolvimento de um grande número de técnicas denominadas, de uma maneira geral, de Métodos de Modelagem Molecular, os quais são capazes de simular várias atividades ou propriedades de uma determinada droga, utilizando técnicas conhecidas como: Correlações entre Estrutura e Atividade (Q.S.A.R = Quantitative Structure Activity Relationships), e Correlações Quantitativas entre Estrutura e Propriedade (Q.S.P.R. = Quantitative Structure Property Relationships)¹. Dentre esses avanços, os índices topológicos têm encontrado considerável sucesso na previsão de uma grande variedade de propriedades físicas, químicas e biológicas².

A técnica que utiliza esses índices, geralmente chamados de descritores topológicos, são números ou combinações desses números derivados da estrutura molecular. O TOP, uma interface computacional desenvolvida pelo grupo de química teórica da UFRuralRJ para calcular tais índices^{3a}, vêm sendo constantemente modificado com o propósito de contemplar outros descritores, e acima de tudo, adicionar novos módulos de manipulação de cálculos que facilitem a interpretação dos resultados obtidos, bem como combiná-los, a fim de se melhorar as correlações dos descritores com a atividade. Este trabalho teve como objetivo melhorar o módulo responsável pelo desenho das estruturas e acima de tudo, introduzir um componente (F1Book), para organização e manipulação dos resultados gerados pelo TOP.

Resultados e Discussão

Em uma versão mais atualizada do programa TOP^{3-b,c}, foi melhorada a interface gráfica que permite, independentemente de outros programas de computador, elaborar o desenho das estruturas moleculares. A linguagem de programação utilizada foi o Delphi 6.0, tendo-se a preocupação de manter a mesma metodologia utilizada no algoritmo anterior (Clipper) no que diz respeito ao tratamento de dados para a geração das subestruturas, e também com a

opção de importar os arquivos com formato sybyl, gerados por outros programas, como por exemplo, o PCModel. Nesta nova versão foi implementado, principalmente, um módulo de cálculo para combinação dos descritores topológicos gerados, de maneira a se obter melhores correlações⁴. Este módulo assemelha-se a uma planilha de cálculo com toda a flexibilidade existente em planilhas existentes. Esta melhoria no programa foi obtida através de um componente existente no Delphi chamado de F1Book. A dificuldade encontrada nesta nova implementação foi com a importação dos dados que são gerados pelo TOP. Os resultados gerados são colocados em um componente denominado de DBGrid que, a partir deste faz-se a exportação para o F1Book, com a preocupação de colocá-los dispostos em colunas para facilitar a manipulação e/ou combinação desses dados. A partir desta planilha, com os resultados dispostos de forma adequada, pode-se elaborar os gráficos, que também, são gerados pelo programa TOP.

Conclusões

A nova apresentação do programa tornou-se mais amigável ao usuário, facilitando a sua utilização. O componente F1Book se mostrou bastante versátil, atendendo as expectativas. Devido a sua grande semelhança com o Excel (Microsoft Office), salvo algumas exceções, suas planilhas podem ser trabalhadas de forma análoga às do Excel. Desta forma, a combinação dos descritores gerados pelo TOP, se tornará algo mais simples e funcional.

Agradecimentos

Ao CNPq e à CAPES pela bolsa e auxílio financeiro

¹ Devillers, J. and Balaban, A.T., Eds. Topological Indices and Related Descriptors in QSAR and Drug Design. Gordon&Breach, Amsterdam (The Netherlands), **2000**.

² Kier, L. B., Hall, L. H., Molecular Connectivity in Chemistry and Drug Research, Academic Press, New York, **1976**.

3 a) Neves, P. J., DaCosta, J. B. N., Ndiyaie, P. M., Carneiro, J. W. M., Química Nova, **1998**, 21(6), 709-713. b) Silva, A. C., Neves, P. J., DaCosta, J. B. N., Carneiro, J. W. M., Resumo da 23a.Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química, vol. 3 QT-044. c) Silva, A. C., Neves, P. J., DaCosta, J. B. N., Resumos da 23o Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional, **2000**, vol. 1, 211.

⁴ Ndiaye, P. M., Neves, P. J., DaCosta, J. B. N., Carneiro, J. W. M., Rosa, C. A. R., Mycotox 98, Revue de Médecine Veterinaire, **1998**, Toulouse-France.